

Nanofitas de SnO₂

Sandra V. da Silva (IC)*¹, João B. L. Martins (PQ)¹, E. Longo (PQ)², Júlio R. Sambrano (PQ)³
e-mail: svsilva@gmail.com

1 - Instituto de Química, UnB, Laboratório de Química Computacional, CP 4478, Brasília, DF, 70904-970

2 - Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, CP 676, São Carlos, SP 13565-905, Brazil

3 - Laboratório de Simulação Molecular – DM, Universidade Estadual Paulista, CP 473, Bauru, SP 17033 – 360, Brazil

Palavras Chave: nanofitas, SnO₂, semi-empírico.

Introdução

Óxido de estanho, um semicondutor do tipo n, com uma banda proibida de 3,6 eV [1], cristaliza-se em uma estrutura tetragonal do tipo rutilo. O óxido de estanho apresenta diversas aplicações como em sensores de gases, células solares, eletrodos transparentes condutores e também como catalisador.

Recentemente estudos de aplicação do SnO₂ como nanomaterial tem sido reportados. Nanopartículas deste óxido são disponíveis e autores relatam as direções mais estáveis de SnO₂ como as preferenciais para formação de nanofitas deste material [2]. As direções de maior estabilidade são a [110], [001] e [010].

Estudos teóricos foram realizados para o crescimento da superfície (110) do SnO₂, utilizando os métodos semi-empíricos PM3, MNDO e o campo de força MM+. Aglomerados de SnO₂ foram desenhados para o estudo da superfície (Figura 1). Foram estudadas as energias dos aglomerados e no caso semi-empírico também o potencial de ionização.

Todos os aglomerados foram completamente otimizados. O programa MOPAC7[3] foi utilizado para o estudo semi-empírico e o Hyperchem 5.1 [4] para o estudo de mecânica molecular.

Resultados e Discussão

A Figura 2 mostra o resultado da energia total calculada para as estruturas de [(SnO₂)₂]_x (X=22...40). As energias apresentadas são das estruturas totalmente otimizadas.

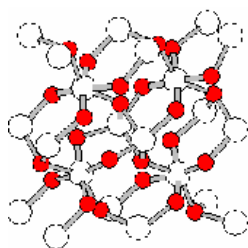
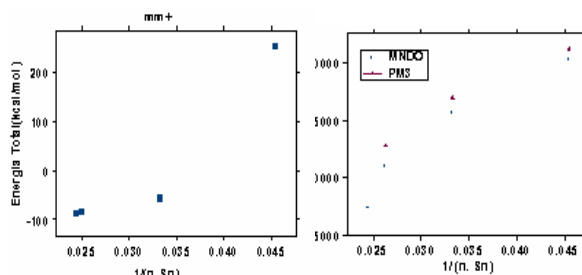


Figura 1- Estrutura do SnO₂ usada para iniciar os modelos otimizados.

Tanto no campo de força, quanto no caso do MNDO e PM3 a Figura 2 mostra que o aumento do

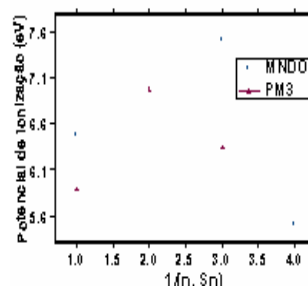
número de unidades de estanho leva a uma saturação da energia de interação, principalmente para o MM+. O potencial de ionização (IP) (Figura 3) apresenta uma diminuição com o aumento do tamanho, variando para o maior aglomerado entre 6,6 e 5,5 eV para o PM3 e o MNDO, respectivamente. Este valor é superior ao encontrado para o cristal de SnO₂ de 3,6 eV[1].

Figura 2. Energia total para as estruturas otimizadas



(MNDO e PM3 em eV e MM+ em kcal/mol).

Figura 3. Potencial de Ionização (eV) para as estruturas otimizadas.



Conclusões

O campo de força MM+ e os métodos semi-empíricos MNDO e PM3 apresentaram uma tendência à saturação da energia de interação dos aglomerados de SnO₂ otimizados.

Agradecimentos

Finattec, CNPq, LNCC, Cenapa/SP.

¹ M. Nagasawa and S. Shionoya, J. Phys. Soc. Jpn., 30 (1971) 158.

² J. Q. Hu, X.L. Ma, N. G. Shang, Z. Y. Xie, N. B. Wong, C.S. Lee, S. T. Lee, J. Phys. Chem. B, 106 (2202) 3823.

³ J. J. P. Stewart, QCPF Bull. 3 (1983) 43

⁴ Hyperchem 5.1, 1998, Hypercube.